UNIVERSITE ABDELMALEK ESSAADI
Faculté des Sciences
-Tétouan-

Année 2008/2009
SMP

T.D. de chimie générale II (Minérale)
Série N° 1

I- 1- Donner les expressions des fonctions d'onde de la molécule H_2.

2- Déterminer les coefficients de normalisation Net N* en fonction de l'intégrale de recouvrement S .

3- Que deviennent les résultats obtenus si S<<1

II- Expliquer pourquoi les espèces chimiques PCl_5 et H_2^+ ; ne respectent-elles pas la règle de Lewis

III- En se basant sur la valeur de l'ordre de liaison ; discuter l'existence de la molécule He_2 et l'ion moléculaire He_2^+.

IV- Soient des molécules diatomiques pour lesquelles les atomes constitutifs ont des orbitales de valence 2s et 2p.

1 Représentez le diagramme énergétique des orbitales moléculaires d'une molécule A_2 en négligeant les interactions entre orbitales 2s et 2p.

2 Que devient le diagramme énergétique précédent lorsque l'interaction s-p existe.

3 Donner les différences d'un diagramme d'énergie d'une molécule hétéronucléaire AB par rapport à celui de la première question.

4 Donner les diagrammes d'énergie pour les molécules O_2 ; N_2 et CO sachant que pour N_2 et CO l'interaction s-p existe.

5 Préciser les propriétés magnétiques des trois molécules.

6 Classer par ordre croissant de longueur de liaison les trois espèces chimiques suivantes : O_2; O_2^- et O_2^+

ETUSUP .com

Série N°1

Exercice I :

1- les expressions des fonctions d'onde de la molécule H_2 :

- $\psi^+ = N(1s_a + 1s_b)$ → O.M liante.
- $\psi^- = N^*(1s_a - 1s_b)$ → O.M antiliante.

2- ψ^+ et ψ^- sont des fonctions d'onde normalisées.

- Soit ψ^+ :

$$\int |\psi^+|^2 dv = 1$$

$$\Rightarrow N^2\left[\underbrace{\int (1s_a)^2 dv}_{1} + \underbrace{\int (1s_b)^2 dv}_{1} + 2\underbrace{\int 1s_a 1s_b dv}_{S}\right] = 1$$

$$N^2(2 + 2S) = 1$$

$$N^2 = \frac{1}{2(1+S)}$$

- par convention on choisir la solution positive :

$$\boxed{N = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}}}$$

- un traitement analogue pour ψ^- nous donne :

$$\boxed{N^* = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}}}$$

3- Si : $S \ll 1$

$$\Rightarrow N \simeq N^* \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

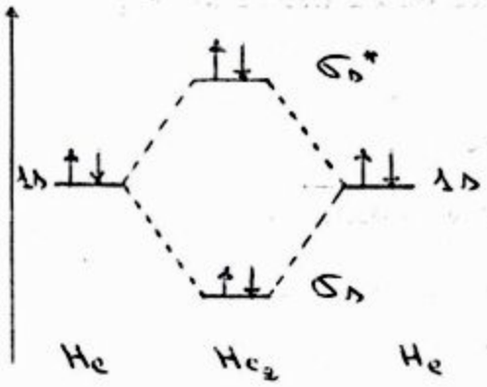
Exercice II :

- dans la molécule PCl_5 l'atome de phosphor contient 10e⁻ sur sa couche de valence au lieu de 8e⁻ prévue par la théorie de Lewis
- la liaison dans l'ion moléculaire H_2^+ est assurée par un seul e⁻ alors que pour la théorie de Lewis les liaisons sont formée par un ou plusieurs doublet électronique.

ETUSUP .com

Exercice III :

- He ($Z=2$) : $1s^2$ → couche de valence.
- $1s_a$ et $1s_b$ $\Big\}$ → σ_s, σ_s^*



- $i = 1/2\,(n - n^*) = 1/2\,(2-2) = 0$.

⇒ Pas de liaison entre les deux atomes He.

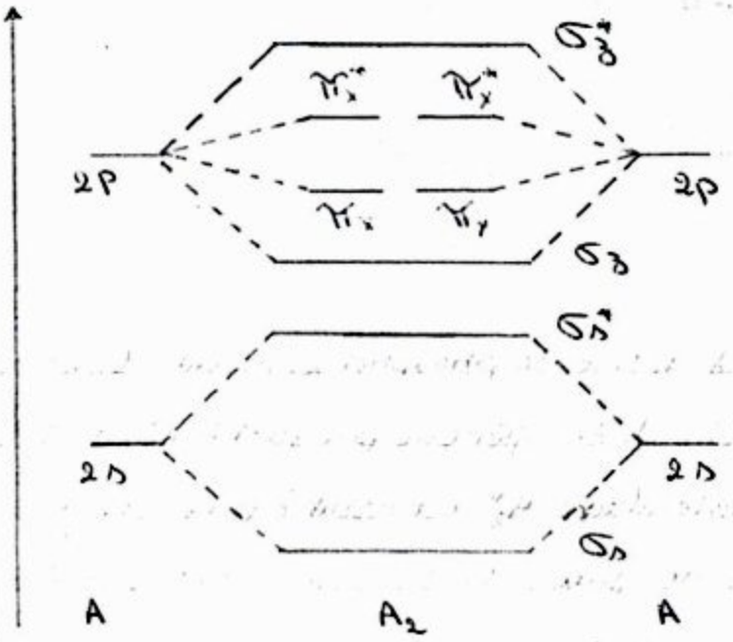
- Conf. élec He_2 : $(\sigma_s)^2(\sigma_s^*)^2$.
- Conf. élec He_2^+ : $(\sigma_s)^2(\sigma_s^*)^1$.
  - $i = 1/2\,(n - n^*) = 1/2\,(2-1) = 1/2$.

- $i \neq 0$ alors l'ion moléculaire peut exister.

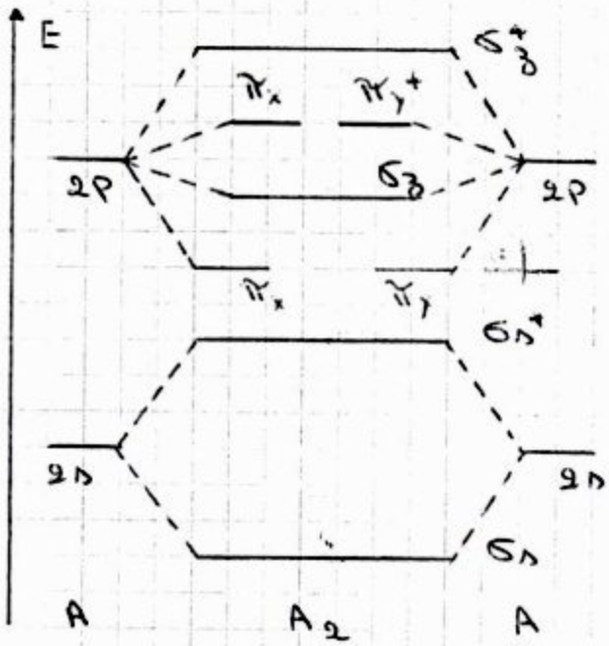
Exercice IV :

1. A_2 (homonucléaire) sans interaction s-p.

→ O.A de valence sont 2s, 2p.



2- A_2 avec interaction s-p dans le cas où cette interaction existe, σ_z devient moins stable que (π_x, π_y).

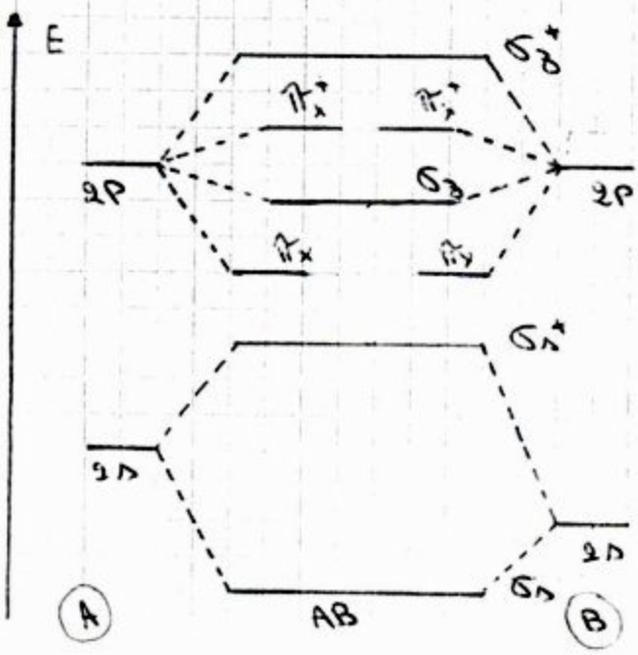


$Z \leq 7$

(II)

3- <u>molécule AB hétéronucléaire</u> :

- les deux atomes A et B qui constituent la molécule sont différents et leur électronégativité respective sont différents.
- les niveaux d'énergie des orbitales atomiques de l'atome le plus électronégativité sont plus les aceux de l'autre atome. le diagrame sera dissymétrique et dans ce cas l'interaction s-p existe toujours.



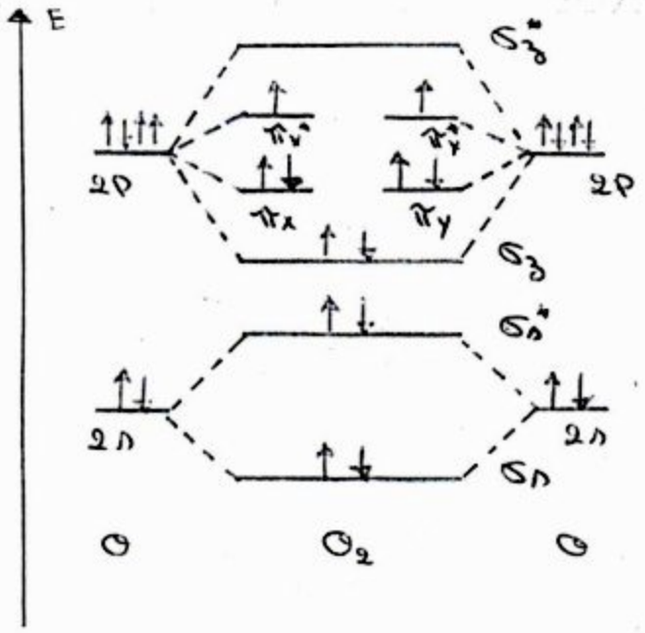
(III)

$\boxed{\chi_A < \chi_B}$

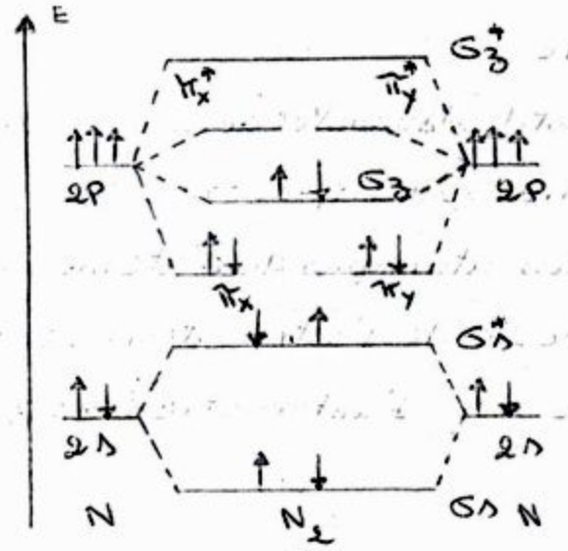
$\begin{cases} E_B < E_A \\ \chi_B > \chi_A \end{cases}$

ETUSUP .com

4. O_2 : $(Z=8)$: $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$.



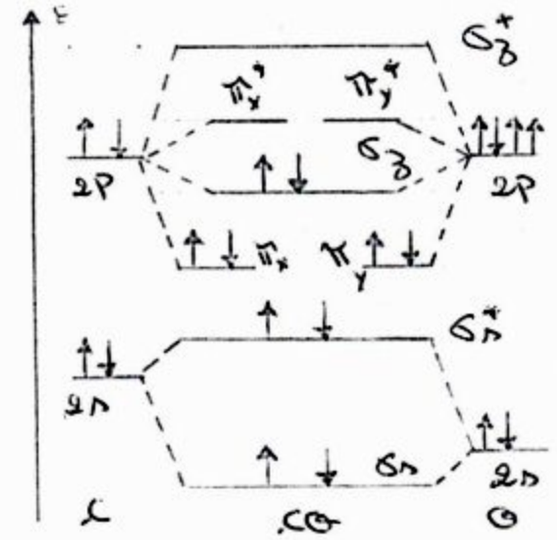
N_2 : $(Z=7)$: $1s^2\ 2s^2\ 2p^3$.



CO : $[(Z=6)C]$ et $[(Z=8)O]$

$1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ $\qquad$ $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$

(l'interaction existe ⚠)



$$\begin{cases} Z_C < Z_B. \\ \chi_C < \chi_B. \\ E_C > E_B. \end{cases}$$

- configurations électroniques :

- O_2 : $(\sigma_s)^2 (\sigma_s^*)^2 (\sigma_z)^2 (\pi_x, \pi_y)^4 (\pi_x^*, \pi_y^*)^2$.

- N_2 : $(\sigma_s)^2 (\sigma_s^*)^2 (\pi_x, \pi_y)^4 (\sigma_z)^2$.

- CO : $(\sigma_s)^2 (\sigma_s^*)^2 (\pi_x, \pi_y)^4 (\sigma_z)^2$.

5- La molécule O_2 est paramagnétique car elle possède deux e- célibataires.

- Les molécules N_2 et CO sont diamagnétique car elles ne contient pas d'e- célibataires.

6- - O_2 : $(\sigma_s)^2 (\sigma_s^*)^2 (\sigma_z)^2 (\pi_x, \pi_y)^4 (\pi_x^*, \pi_y^*)^2$.

- O_2^- : $(\sigma_s)^2 (\sigma_s^*)^2 (\sigma_z)^2 (\pi_x, \pi_y)^4 (\pi_x^*, \pi_y^*)^3$.

- O_2^+ : $(\sigma_s)^2 (\sigma_s^*)^2 (\sigma_z)^2 (\pi_x, \pi_y)^4 (\pi_x^*, \pi_y^*)^1$.

	O_2	O_2^-	O_2^+
i	2	1,5	2,5

Donc : $\ell(O_2^+) < \ell(O_2) < \ell(O_2^-)$.

$(i(O_2^-) < i(O_2) < i(O_2^+))$

ETUSUP .com

ETUSUP.com

Programmation
Cours
Informatique
Optique
Chimie
Algébre
Corrigés
Mathématiques
Travaux Pratiques
Electricité
Physique
Résumés
Analyse
Diapo
Exercices
Livres
Contrôles Continus
Langues
MTU
Mécanique
Thermodynamique
Multimedia
Divers
Economie
Travaux Dirigés
Droit
Chimie Organique

et encore plus..